

$$\sigma_n \approx \frac{e^2 \left( \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{3}{2y_0^2} \right)^{-2}}{\sqrt{2\pi\hbar^3 m^2 \Delta^2 \Lambda}} \exp(4\pi\mu\Lambda^2 / \hbar^2). \quad (14)$$

Температурна залежність  $\sigma_n$  визначається хімічним потенціалом одновимірного електронного газу:

$$\mu(T) \approx \mu_0 \left[ 1 + \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 \right], \quad (15)$$

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2}{8m} (\pi n)^2, \quad (16)$$

де  $n = N/L$  – кількість електронів на одиниці довжини дроту.

Зауважимо, що отримані температурні залежності статичної електропровідності вздовж напівпровідникового квантового дроту при розсіянні з поворотом спіну електрона внаслідок одномірних гауссівських флуктуацій спин-орбітальної взаємодії суттєво відрізняються від випадку розсіяння без зміни орієнтації спіну, зумовленого випадковим полем гауссівських флуктуацій товщини [6] дроту.

1. Dresselhaus G. Spin-orbit coupling effects in Zinc Blende structures // Phys. Rev. – 1955. – V.100. – №2. – P.580–586.
2. Рашба Э.И. Свойства полупроводников с петель экстремумов // ФТП. – 1960. – Т.2. – №6. – С.1224–1237.
3. Возняк О.М. Врахування впливу спин-орбітальної взаємодії на енергетичний спектр ідеальних кристалів та неупорядкованих твердих тіл у методі сильного зв'язку // Фізика і хімія твердого тіла. – 2005. – Т.6. – №3. – С.351–361.
4. Магарилл Л.И., Чаплык А.В. Спин-зависимая локализация электронов в кристаллах // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – Т.81. – №4. – С.198–202.
5. Efros A.L., Rashba E.I. Theory of electric dipole spin resonance in a parabolic quantum well // Phys. Rev. – 2006. – V.73. – P.165325-1–165325-19.
6. Рувинский М.А., Рувинский Б.М. О влиянии флуктуаций толщины на статическую электропроводность квантовой полупроводниковой проволоки // ФТП. – 2005. – Т.39. – №2. – С.247–250.
7. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. – М.: Наука, 1978. – 616 с.
8. Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. – М.: Наука, 1984. – 352 с.
9. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев А.И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. – М.: Наука, 1981. – 800 с.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1974. – 752 с.
11. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. – М.: Наука, 1977. – 672 с.

*The expressions for a relaxation time, an electron mobility and static electroconductivity along a semiconductor quantum wire conditioned by one-dimensional Gaussian fluctuations of spin-orbital interaction wire electrons are obtained. For nondegenerate statistics of carriers at low temperatures statistics of carriers at low temperatures (T) the electron mobility  $u_n \propto T^{-1/2}$ .*

**Key words:** quantum semiconductor wire, one-dimensional Gaussian fluctuations, electron mobility, static electroconductivity.

УДК 621.315.592

ББК 22.379.23

О.М. Возняк, Л.І. Никуруй, О.І. Ільків

### ВАРІАЦІЙНИЙ ПІДХІД ДО РОЗГЛЯДУ ЯВИЩ ПЕРЕНОСУ В НАПІВПРОВІДНИКАХ НА ОСНОВІ КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ БОЛЬЦМАНА (I)

*Розглянуто загальний підхід до опису нерівноважних процесів у напівпровідниках. Зроблено аналіз варіаційного підходу до розгляду явищ переносу на основі кінетичного рівняння Больцмана. Наведено матричні елементи оператора зіткнень для різних механізмів розсіювання.*

**Ключові слова:** явища переносу, кінетичне рівняння Больцмана, варіаційний метод, рухливість носіїв.

**Вступ.** Явища переносу в напівпровідниках виникають при дії на систему зовнішніх чинників – температури, електричного та магнітного полів, радіаційного опромінення, світла тощо. Ці процеси прийнято називати нерівноважними. Найзагальніший підхід до їх опису базується на використанні так званої матриці густини [1]. Проте його рідко можна реалізувати для конкретних систем навіть при малих відхиленнях їх від рівноважного стану. Тому на практиці використовують або феноменологічний підхід, що базується на теорії Онзагера [2], або мікроскопічний підхід, що має назву кінетичного, в якому нерівноважну систему характеризують  $n$ -частинковими функціями розподілу, які мають зміст імовірності того, що окремі  $n$ -частинки багаточастинкової системи набувають певних значень фізичних величин. Для цих функцій розподілу запропоновано ланцюжок нескінченної кількості взаємопов'язаних рівнянь [1]. У цьому підході чим детальнішим є опис системи, тим вищою буде розмірність системи рівнянь, і, відповідно, тим складнішим буде знаходження розв'язку поставленої задачі. Стосовно класичних явищ переносу, то в багатьох випадках достатньо обмежитися лише одночастинковою функцією розподілу, рівняння для якої відоме як рівняння Больцмана [1].

### Кінетичне рівняння Больцмана та його узагальнення

Кінетичне рівняння Больцмана може бути застосоване для опису руху електронів у кристалі, якщо він квазікласичний, тобто якщо всі зміни в системі та всі потенціали повільно змінюються на відстанях, що мають порядок величини міжатомних. Але оскільки стан електрона в кристалі визначається квазіхвильовим вектором, то й нерівноважна функція розподілу залежатиме не від швидкостей, а від квазіхвильового вектора  $\vec{k}$ , крім того, від координат  $\vec{r}$  і часу  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ .

Для процесів, що встановилися й відбуваються під впливом стаціонарних полів, зміни функції розподілу під їх впливом  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}}$  компенсуються процесами зіткнень, не пов'язаними із зовнішніми полями  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{зіткн}}$ , тобто:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{зіткн}} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} &= (\vec{v}, \nabla_{\vec{r}} f) - \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{H}] \right) \nabla_{\vec{k}} f, \\ \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{зіткн}} &= \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \{ f(\vec{k}') - f(\vec{k}) \}, \end{aligned}$$

$W(\vec{k}, \vec{k}')$  – імовірність того, що електрон перейде зі стану  $\vec{k}$  у стан  $\vec{k}'$  за одиницю часу,  $\vec{v}$  – швидкість носія,  $\vec{E}$  і  $\vec{H}$  – електрична й магнітна складові напруженості електромагнітного поля,  $\Delta_{\vec{r}} f$  і  $\Delta_{\vec{k}} f$  – градієнти функції розподілу в просторі координат і квазіхвильового вектора.

Класичні кінетичні явища відносяться до так званих слабонерівноважних процесів, для яких нерівноважну функцію розподілу подають у вигляді [3]:

$$f = f_0(E) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi(\vec{k}), \quad (2)$$

де  $f_0(E)$  – функція розподілу рівноважної системи,

$\Phi(\vec{k})$  – нерівноважний додаток до рівноважної функції,

$\frac{\partial f_0}{\partial E}$  – введено для зручності.

Тоді лінеаризоване рівняння Больцмана для функції  $\Phi(\vec{k})$  набуває вигляду:

$$\begin{aligned} & (\vec{v}, \nabla_k f_0) - \frac{e}{\hbar} \left( \bar{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{H}] \nabla_k \Phi(\vec{k}) \right) \nabla_k f_0 = \\ & - \frac{1}{k_0 T} \int W(\vec{k}, \vec{k}') f_0(E) (1 - f_0(E)) [\Phi(\vec{k}) - \Phi(\vec{k}')] d\vec{k}. \end{aligned} \quad (3)$$

Розв'язок навіть такого лінеаризованого рівняння викликає значні математичні труднощі. У так званому наближенні часу релаксації внесок, що описує зіткнення, записують так:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{зіткн}} = - \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (4)$$

У цьому наближенні розглядається більшість кінетичних явищ у твердих тілах [3].

### Елементи варіаційного методу аналізу кінетичних явищ і матричні елементи оператора зіткнень

При непружному розсіюванні носіїв, як у вузькощілинних напівпровідниках зі складним законом дисперсії, наближення часу релаксації стає некоректним. Тому використовують інші наближені методи розв'язку рівняння Больцмана. Серед них у теорії напівпровідників великого поширення набув варіаційний метод [4, 5]. Зважаючи на екстремальні властивості розв'язків лінеаризованого рівняння Больцмана, для їх знаходження можна застосувати звичайний варіаційний підхід. Для цього функцію  $\Phi(\vec{k})$  вибирають у вигляді лінійної комбінації відомих функцій, які є степеневими функціями від енергії, а коефіцієнти при них слугують підгоночними параметрами. Останні вибирають так, щоб мінімізувати відповідний функціонал [4].

Для спрощення введемо позначення:

$$\hat{L}\Phi(\vec{k}) = \frac{1}{k_0 T} \int W(\vec{k}, \vec{k}') f_0(E) (1 - f_0(E)) [\Phi(\vec{k}) - \Phi(\vec{k}')] d\vec{k}, \quad (5)$$

$$X = - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \left( e\bar{E} - \nabla \xi - \frac{E - \xi}{T} \nabla T \right) \vec{v} + \frac{e}{c} [\vec{v}, \vec{H}] \nabla_k \Phi(\vec{k}) \right\}. \quad (6)$$

Тоді лінеаризоване рівняння Больцмана (3) можна переписати так:

$$\hat{L}\Phi(\vec{k}) = X. \quad (7)$$

У загальному випадку система може складатися з кількох сортів частинок, тоді рівняння (7) трансформується в систему лінійних кінетичних рівнянь, яку формально можна записати в такому вигляді:

$$\sum_{j=1}^n \hat{L}_{ij} \Phi_j(\vec{k}) = X_i, \quad (8)$$

а під операторами  $\hat{L}_{ij}$  розуміють лінійну комбінацію операторів  $\hat{L}_i^\nu$ , які відповідають різним механізмам розсіювання, а індекс  $\nu$  вказує на тип механізму розсіювання носіїв. Тоді:

$$\hat{L}_i^\nu \Phi_j(\vec{k}) = \frac{1}{k_0 T} \int W_{ij}^\nu(\vec{k}, \vec{k}') f_{0i}(E) (1 - f_{0i}(E)) [\Phi_j(\vec{k}) - \Phi_j(\vec{k}')] d\vec{k}, \quad (9)$$

$$X_i = - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f_{0i}}{\partial E} \left\{ \left( e\bar{E} - \nabla \xi - \frac{E - \xi}{T} \nabla T \right) \vec{v}_i + \frac{e}{c} [\vec{v}_i, \vec{H}] \nabla_k \Phi(\vec{k}) \right\}. \quad (10)$$

Використовуючи варіаційну процедуру, пробні функції записують у вигляді ряду за степенями  $(E - E_F)$ , тобто:

$$\Phi_i(\vec{k}) = \sum_{\beta=1}^3 \sum_{n=0}^{\infty} c_{in}^\beta k_\beta (E - E_F)^n, \quad (11)$$

де  $c_{in}^\beta$  – коефіцієнти розкладу, що слугують варіаційними параметрами.

Варіаційна процедура полягає в тому, що кінетичні рівняння (8) можна одержати з умови стаціонарності деякого функціонала, який за відсутності магнітного поля має вигляд:

$$F[\Phi] = \left( \Phi; \hat{L}_y \Phi \right) - \left( \frac{\partial f_0}{\partial E} v_i \left[ eE - \nabla \xi - \frac{E - \xi}{T} \nabla T \right], \Phi \right), \quad (12)$$

де 
$$\left( \Phi(\bar{p}), \hat{L} \Phi(\bar{p}) \right) = \int \Phi^*(\bar{p}) \hat{L} \Phi(\bar{p}) d\bar{p}.$$

При представленні функцій  $\Phi_i(\bar{k})$  у вигляді ряду за степенями (11) з умови екстремальності функціонала  $\frac{\partial F}{\partial c_m^{\beta}} = 0$  одержують систему звичайних алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів розкладу:

$$\sum_{j=1}^k \sum_{\beta=1}^3 \sum_{n=0}^{\infty} (L_{ij})_{nn}^{\beta\beta} c_{jn}^{\beta} = b_m^{\beta}, \quad (13)$$

де 
$$(L_{ij})_{nn}^{\beta\beta} = \left( p_{\beta} (E - E_F)^n, \hat{L}_{ij} p_{\beta} (E - E_F)^n \right),$$

$$b_m^{\beta} = - \left( v_i(\bar{p}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ eE - \nabla \xi - \frac{E - \xi}{T} \nabla T \right], p_i (E - E_F)^n \right).$$

Для складних законів дисперсії носіїв струму та при врахуванні непружних механізмів розсіювання розрахунок матричних елементів  $(L_{nn}^{\beta\beta})_{непруж}$ , що входять у вирази для кінетичних коефіцієнтів, викликає нездоланні труднощі. Спрощення можна досягнути лише тоді, коли носії струму є виродженими, оскільки при цьому нерівноважна функція розподілу  $f(\bar{k})$  відрізняється від рівноважної лише у вузькому інтервалі енергій поблизу енергії Фермі, що суттєво спрощує розрахунок інтегралів. Проте навіть у такому випадку розрахунок матричних елементів ще супроводжується значними математичними труднощами.

Виявляється, що провідність, а також інші кінетичні коефіцієнти з достатньою точністю можна знайти, якщо в розкладі (11) обмежитися членами з  $n = 0; 1$ . У цьому випадку система рівнянь (13) містить лише два рівняння. Ще більшого спрощення можна досягнути, якщо обмежитися розглядом лише рухливості носіїв, оскільки в цьому випадку достатньо врахувати в розкладі (11) лише доданок з  $n = 0$ . Тоді:

$$\Phi(\bar{k}) = C_0 k, \quad (14)$$

а для рухливості вдається одержати достатньо простий вираз. Для носіїв, енергетичний спектр яких описується законом Кейна, він записується так:

$$\mu = - \frac{enkT}{L_{00}}, \quad (15)$$

де  $n$  – концентрація носіїв струму,

$L_{00}$  – матричні елементи оператора розсіювання носіїв.

При одночасній дії декількох механізмів розсіювання матричні елементи  $L_{00}$  додаються між собою, як і обернені часи релаксації, тому їх можна записати так:

$$L_{00} = \sum_i L_{00}^i, \quad (16)$$

де  $i$  нумерує механізми розсіювання.

В аналітичній формі вирази для матричних елементів подані в монографії [5], і при домішковому розсіюванні вони мають такий вигляд:

$$(L_i)_{kk}^{\beta\beta} = -2e^{-4} N \iint d\bar{p} d\bar{p}' \varphi_i(|\bar{p} - \bar{p}'|) \delta(\varepsilon - \varepsilon') \varepsilon^{k+k'} (\bar{p}^{\beta} - \bar{p}'^{\beta}) (\bar{p}^{\beta} - \bar{p}'^{\beta}) f_0(\varepsilon). \quad (17a)$$

І тут  $\varphi_i(g) = \{ \chi_0^0 g_0^2 + \chi_1^0 g_1^2 + v^2 \}^{-2}$ ,  $\bar{g} = \bar{p} - \bar{p}'$ ,  $v^2 = \hbar^2 a^2$ ,  $a$  – стала ґратки.

Для розсіювання на акустичних фононах:

$$(L_i)_{kk}^{\beta\beta} = - \frac{4mn(k_0 T)^{k+k'+1}}{3\sqrt{\pi} \tau_1^0 (k_0 T)} (k+k'+2)! \delta_{\beta\beta} \quad (17b)$$

Для розсіювання на оптичних фононах:

$$(L_o)_{kk}^{\alpha\beta} = -n' \sqrt{\frac{8m_{\perp} m_{\parallel} T_o}{\pi}} a_o^{(\prime)} T_o^{k+k'} \psi_{\alpha\beta}^{(\prime)}(k+k'). \quad (17c)$$

При сильному виродженні та законі дисперсії Кейна їх можна записати у вигляді:

$$L_{\infty}^{\prime} = \frac{nkTm^*(E_F)}{\tau_i}, \quad (18)$$

де  $m^*(E_F)$  – ефективна маса носіїв на рівні Фермі,  $\tau_i$  – час релаксації  $i$ -го пружного механізму розсіювання.

Таку саму форму запису для матричних елементів можна зберегти й для непружних механізмів розсіювання, проте час релаксації виявляється складною функцією температури та концентрації. Тоді вираз для рухливості набуває відомої форми [3]:

$$\mu = \frac{e\tau(E_F, n, T)}{m^*(E_F, n, T)}, \quad (19)$$

де  $\tau = \left( \sum_i \tau_i^{-1} \right)^{-1}$  – сумарний час релаксації.

### III. Розрахунок рухливості носіїв

При розрахунках рухливості носіїв зручно використовувати не формулу (17), а іншу, що має вигляд [6]:

$$\mu = A(E_F, n, T) \sum_i B_i^{-1} F_i^{-1}, \quad (20)$$

де  $A(E_F, n, T) = \frac{\epsilon_{cm} \hbar^3 k_F}{e k_o T} [m^*(E_F)]^{-2}$  і має розмірність рухливості,

$B_i$  і  $F_i$  – безрозмірні величини, що пов'язані з часом релаксації носіїв  $\tau_i$ ,

$\epsilon_{cm}$  – статична діелектрична проникливість напівпровідника,

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}.$$

Відповідні вирази для величин  $B_i$  і  $F_i$ , що відповідають  $i$ -му механізму розсіювання, подані в [6].

При домішковому розсіюванні:

$$B_i = \frac{2\pi N_i}{\chi_o k_o T} \left( \frac{e}{k_F} \right)^2,$$

$$F_i = \ln(\xi_o + 1) - \xi_o (\xi_o - 1)^{-1} - 4L[1 + (\xi_o - 1)^{-1} - 2\xi_o^{-1} \ln(\xi_o + 1)] + \frac{3}{2} L^2 \left( 1 - 4\xi_o^{-1} + 6\xi_o^{-2} \ln(\xi_o + 1) - 2\xi_o^{-1} (\xi_o - 1)^{-1} \right), \quad (21a)$$

$$\text{де } \xi_o = (2k_F \lambda_o), \quad L = \frac{\epsilon_{\perp}}{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}.$$

Для акустичних фононів:

$$B_{ac} = \frac{\chi_o}{\pi \rho} (k_F E / ev_o^2)^2,$$

$$F_{ac} = 1 - 1.2L + \left[ 0.36 + \frac{1}{8} \left( \frac{v_{\parallel}}{v_{\perp}} \right)^2 \right] L^2, \quad (21b)$$

де  $\rho$  – густина,  $E$  – константа деформаційного потенціалу,  $v_{\parallel}$  і  $v_{\perp}$  – поздовжня та поперечна компоненти швидкості звуку в кристалі.

Для оптичних фононів:

$$B_0 = 2 \left( \frac{\chi_0}{\chi_x} - 1 \right), \quad (21c)$$
$$F_0 = 1 - 2L + \frac{3}{2}L^2.$$

Для вакансій:

$$B_s = \frac{2ek_F}{3\pi\chi_0 k_0 T}, \quad F_s = \ln(1 + \xi_0) - \xi_0(\xi_0 + 1)^{-1}. \quad (21d)$$

### Висновки

1. Зазначено, що використання наближення часу релаксації до опису явищ переносу в напівпровідниках із непружними механізмами розсіювання є некоректним.
2. Показано, що для вузькощілинних напівпровідників із складними законами дисперсії доцільно застосовувати варіаційні підходи.
3. Подано матричні елементи оператора зіткнень для розрахунку рухливості вироджених напівпровідників.

1. Пинхир А. Статистическая физика. – М.: Мир, 1973. – 471 с.
2. Тубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 416 с.
3. Анисельм А.И. Введение в теорию полупроводников. – М.: Наука, 1978. – 616 с.
4. Дьячипи И.М., Томчук П.М. Явления переноса и флуктуации в полупроводниках. – К.: Наукова думка, 1981. – 320 с.
5. Горлей П.Н., Шендеровский В.А. Вариационный метод в кинетической теории. – К.: Наукова думка, 1992. – 296 с.
6. Гинзбург Н.П., Горлей П.Н., Паранчич Л.Д. и др. Механизмы рассеяния носителей заряда в твердых растворах Mn, Hg<sub>1-x</sub>Te, Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Se, Zn<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Se. – К.: Препринт Ин-та физики АН УССР, 1982. – 42 с.

*General approach is considered to description of nonequilibrium processes in semiconductors. The analysis of variation approach is done to consideration of the phenomena of transfer on the basis of the kinetic equalization Boltzman. The matrix elements of operator of collisions are resulted for different mechanisms of dispersion.*

**Key words:** *phenomena of transfer, kinetic equalization Boltzman, variation method, mobility of semiconductors.*

УДК 538.975, 539.26, 669-17

АВВ 22.371.21

І.П. Яремій, В.І. Кравець, В.М. Пилипів, С.І. Яремій

## СТРУКТУРНА ДІАГНОСТИКА ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРІВ ІОННО-ІМПЛАНТОВАНИХ МОНОКРИСТАЛІВ ТА ПЛПВОК ЗІ СТРУКТУРОЮ ГРАНАТУ

*Проведено порівняльний аналіз можливостей визначення параметрів порушеного шару на основі різних теоретичних підходів (кінематичної, динамічної та статистичної динамічної теорій розсіювання рентгенівських променів), а також встановлено критерії їх використання. Уніфікована методика обчислення профілів деформації та оцінки ступеня однозначності їх визначення.*

**Ключові слова:** *ферит-гранатові плівки, профілі деформації, розсіювання рентгенівських променів, кінематична та динамічна теорії.*

**Вступ.** Властивості функціональних мікроелектронних пристроїв у значній мірі визначаються тензором напруг, наведених у приповерхневому шарі монокристала чи плівки при легуванні, дифузійному насиченні, іонній імплантації або термообробці, тому дослідження структурного розподілу структурних характеристик у вказаному шарі є однією з важливих проблем фізики твердого тіла.